



Prof. dr hab. inż. Piotr Konieczka
Katedra Chemii Analitycznej
Wydział Chemiczny
Politechnika Gdańska
e-mail: piotr.konieczka@pg.edu.pl

Gdańsk, 3 sierpnia 2023

RECENZJA

rozprawy doktorskiej mgr. inż. Łukasza Kota pt.:
**"System ekspertowy wspomagający kontrolę jakości pomiarów w laboratorium
analitycznym"**

Promotor pracy: dr hab. Wojciech Hyk, prof. UW

Opiniowana rozprawa doktorska, została zrealizowana w Pracowni Teorii i Zastosowań Elektrood, Zakładu Chemii Nieorganicznej i Analitycznej, Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego.

Tematyka rozprawy dotyczy opracowania i wykorzystania systemu ekspertowego w celu wspomagania kontroli i zapewnienia jakości wyników pomiarów uzyskiwanych w laboratoriach analitycznych.

Podjęcie tematyki badawczej przez Doktoranta z całą pewnością jest zgodne z trendami rozwojowymi badań w analityce chemicznej. Wynik pomiaru, jako końcowy „produkt” pracy analityka jest bowiem takim parametrem, którego wartość staje się podstawą wnioskowania o badanym obiekcie. Konsekwencją danego wnioskowania jest z kolei podjęcie decyzji np.: odrzucenie bądź przyjęcie wytworzonego produktu, stwierdzenie o spełnieniu czy nie spełnieniu norm dotyczących stanu środowiska, wprowadzenie bądź nie planu leczenia itp.

Z tego to powodu niezbędna jest kontrola jakości otrzymywanych wyników pomiarów. Ponieważ zdecydowana większość analiz chemicznych wykorzystuje zasadę pomiaru pośredniego, w celu kontroli jakości wyników analitycznych zastosowanie znajduje przede wszystkim statystyka matematyczna. Ta dziedzina



nauki, jako część matematyki, bywa bardzo często przysłowiową „piętą achillesową” w trakcie etapu opracowywania wyników pomiarów. Dlatego podjęcie się przez Doktoranta opracowania systemu ekspertowego, wykorzystującego podstawowe narzędzia statystyczne w celu kontroli i zapewnienia jakości otrzymywanych wyników pomiarów uważam za zadanie jak najbardziej potrzebne, zwłaszcza w przypadku jego wykorzystania w rutynowych laboratoriach analitycznych.

Układ redakcyjny rozprawy jest typowy dla tego typu prac i składa się z:

- wstępu,
- części teoretycznej, w której skład wchodzi podrozdziały dotyczące charakterystyki podstawowych narzędzi wykorzystywanych w procesie kontroli i zapewnienia jakości wyników, opisu wykorzystywanych w tym procesie schematów decyzyjnych,
- części doświadczalnej, w której Doktorant podał pełną charakterystykę opracowanego systemu ekspertowego zawierającą jego cel, schemat decyzyjny oraz założenia; przedstawił w niej także praktyczne przykłady jego zastosowania,
- streszczeń pracy w języku polskim i angielskim,
- spisu wykorzystanej literatury, rysunków i tabel.

Zwieńczeniem rozprawy są załączniki, w którym Doktorant zestawiał tabele z obliczeniami, które wygenerowane zostały przez wykorzystywane w obliczeniach oprogramowanie e-stat.

Część teoretyczna pracy zawiera wszystkie niezbędne informacje wstępne związane z tematyką rozprawy. Mgr inż. Łukasz Kot, wykorzystał w trakcie jej opracowania ok. 100 źródeł literaturowych. Jest to z całą pewnością opracowanie jak najbardziej aktualne i rzetelne.

Część doświadczalna pracy to dokładne opisy dotyczące zarówno planowania jak i przeprowadzenia poszczególnych badań, które są zawsze zwieńczone bardzo wyważonymi i logicznymi podsumowaniami.

Pragnę tu szczególnie podkreślić logicznie i przejrzysto (tu na pewno wielką rolę odgrywają zarówno bardzo czytelne tabele jak i rysunki oraz schematy) przekazane informacje dotyczące przeprowadzonych badań.



Wnioskowanie, będące zwięźceniem opiniowanej rozprawy, jest bardzo logiczne i poparte wynikami przeprowadzonych badań.

Z obowiązku Recenzenta prosiłbym o komentarz i wyjaśnienia poniższych kwestii.

1. Wśród wymienionych narzędzi systemu kontroli i zapewnienia jakości pomiarów na str. 11 pracy są karty kontrolne a na rysunku 1 zamiast nich materiały odniesienia. Który z zestawu tych narzędzi jest zatem poprawny?
2. Doktorant na schemacie przedstawionym na rysunku 2 podaje termin specyficzność, podczas gdy na kolejnych stronach rozprawy – rozdział poświęcony walidacji, pojawia się termin selektywność. Prosiłbym o komentarz jaka (jeśli taka istnieje) jest różnica między tymi terminami.
3. Czy przedstawiona graficznie sytuacja na rysunku 7 (środkowa tarcza) obrazuje faktycznie wysoką dokładność wyników?
4. Na stronie 39 Doktorant komentuje wartości S/N w przypadku szacowania granicy wykrywalności podając, iż w przypadku gdy S/N jest wyższe od 10 to oznacza to: „....wyznaczona granica wykrywalności jest większa od oznaczonej granicy oznaczalności”. Nie bardzo rozumiem to stwierdzenie. Z reguły postępowanie przy wyznaczaniu LOD i LOQ jest takie, że najpierw szacowana jest wartość LOD i w przypadku potwierdzenia poprawności jej oszacowania obliczana jest wartość LOQ. Zatem w sytuacji, gdy wartość LOD nie jest oszacowana poprawnie nie znana jest jeszcze wartość LOQ.
5. Rysunek 18 strona 67 – oś 0X opisana jest jako numer laboratorium, z tym, że brak wśród etykiet numerów...
6. Na stronie 71 w zdaniu na temat wkładu bias do niepewności podano zwrot: „....w kształtowanie przedziału niepewności...”. Z kolei podstawowa definicja niepewności zaczyna się od stwierdzenia: „....niepewność to przedział wokół wartości oznaczonej...”. Co zatem oznacza zacytowane stwierdzenie? Czy można mówić o przedziale niepewności skoro niepewność z definicji jest już przedziałem?
7. Schemat decyzyjny dla zapewnienia spójności pomiarowej – str. 80. Dlaczego w postępowaniu nie uwzględniono także porównania wartości średniej



otrzymanej przy zastosowaniu analizatora stacjonarnego z wartością odniesienia, tak jak to zrobiono w przypadku analizatora on-line? Czy założenie było takie, że analizator stacjonarny traktujemy jako analizator odniesienia?

8. Nie znalazłem informacji co należy zrobić w przypadku, gdyby okazało się, iż stosując test F do porównania wartości odchyłeń standardowych stwierdzono by statystycznie istotną różnicę w ich wartościach. Co w takim przypadku z dalszą częścią algorytmu?
9. Tabela 5 strona 102. Wyniki podane w tabeli powinny być jednak zapisywane w sposób jednolity. Skoro niepewność podano z 2 cyframi znaczącymi, to także i w przypadku wyniku zapisanego jako: „166,3±16,1” poprawny zapis to jednak 166±16, natomiast w przypadku wyniku zapisanego jako: „11,7±0,7” zapis powinien być skorygowany przez dodanie zarówno do niepewności jak i wyniku jednego miejsca dziesiętnego.

Wymienione powyżej uwagi i pytania nie zmieniają mojej bardzo pozytywnej oceny merytorycznej pracy, w ramach której Doktorant opracował bardzo użyteczne narzędzie, które z powodzeniem może być zastosowane w szeroko rozumianej kontroli i zapewnieniu jakości wyników pomiarów analitycznych. Dodatkowo jako bardzo innowacyjną i przydatną uważam umieszczoną na stronach 127-131 w tabeli 9 bazę danych dotyczącą zestawienia możliwych do wykonania operacji logicznych w oparciu o przyjęte kryteria.

Praca w mojej ocenie spełnia aktualne wymagania merytoryczne i formalne ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, wnoszę więc do Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu Warszawskiego o dopuszczenie mgr. inż. Łukasza Kota do kolejnych etapów przewodu doktorskiego.



KIEROWNIK
Katedry Chemii Analitycznej

prof. dr hab. inż. Piotr Korzeniowski